

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11) Publication number : 2002-338588
 (43) Date of publication of application : 27.11.2002

(51) Int. Cl. C07F 15/00
 C09K 11/06
 H05B 33/14

(21) Application number : 2002-043536 (71) Applicant : CANON INC
 (22) Date of filing : 20.02.2002 (72) Inventor : TAKIGUCHI TAKAO
 TSUBOYAMA AKIRA
 KAMATANI ATSUSHI
 OKADA SHINJIRO
 MIURA KIYOSHI
 MORIYAMA TAKASHI
 KOGORI MANABU

(30) Priority

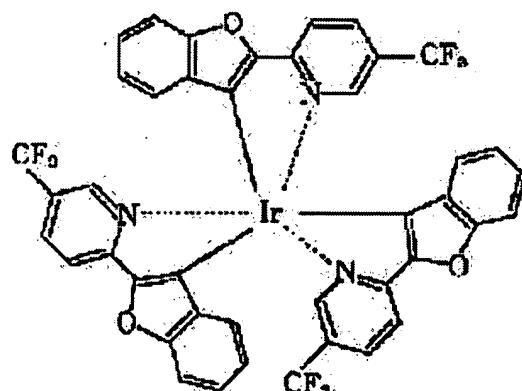
Priority number 2001072665 Priority date 14.03.2001 Priority country JP
 : : :

(54) METAL COORDINATED COMPOUND, ELECTROLUMINESCENT ELEMENT AND DISPLAY DEVICE

(57) Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a new compound realizing a light-emitting element having high luminous efficiency, keeping high luminance over a long period and resistant to the deterioration with electrical current and provide a light-emitting element.

SOLUTION: The electroluminescent element is provided with a pair of electrodes formed on a substrate and a luminescent layer containing at least one kind of organic compound and placed between the electrodes. The luminescent layer contains a metal-coordinated compound having a benzofuran group and expressed by the formula.



LEGAL STATUS

[Date of request for examination] 24.11.2004

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number]

[Date of registration]

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2002-338588

(P2002-338588A)

(43) 公開日 平成14年11月27日 (2002.11.27)

(51) Int.Cl.⁷

C 07 F 15/00

識別記号

F I

テマコト⁷ (参考)

C 07 F 15/00

B 3 K 0 0 7

E 4 H 0 5 0

F

C 09 K 11/06

6 6 0

C 09 K 11/06

6 6 0

H 05 B 33/14

H 05 B 33/14

B

審査請求 未請求 請求項の数15 O L (全32頁)

(21) 出願番号

特願2002-43536 (P2002-43536)

(71) 出願人 000001007

キヤノン株式会社

東京都大田区下丸子3丁目30番2号

(22) 出願日 平成14年2月20日 (2002.2.20)

(72) 発明者 滝口 隆雄

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ

ノン株式会社内

(31) 優先権主張番号 特願2001-72665 (P2001-72665)

(72) 発明者 坪山 明

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ

ノン株式会社内

(32) 優先日 平成13年3月14日 (2001.3.14)

(74) 代理人 100069017

(33) 優先権主張国 日本 (JP)

弁理士 渡辺 徳廣

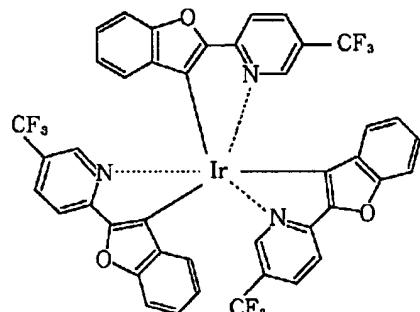
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 金属配位化合物、電界発光素子及び表示装置

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 高効率発光で、長い期間高輝度を保ち、通電劣化の小さい発光素子を実現する新規化合物及び発光素子の提供。

【解決手段】 基板上に設けられた一対の電極間に、少なくとも一種の有機化合物を含む発光層を備える電界発光素子であって、前記発光層が下記に例示されるベンゾフラン基を持つ金属配位化合物を含む電界発光素子。



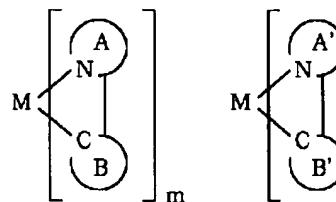
【特許請求の範囲】

【請求項1】 下記一般式(1)で示されることを特徴とする金属配位化合物。

【化1】



[式中、MはIr, Pt, RhまたはPdの金属原子であり、LおよびL'は互いに異なる二座配位子を示す。]



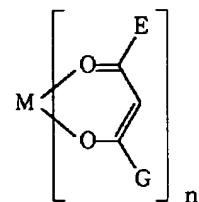
(2)

(3)

NとCは、窒素原子および炭素原子であり、AおよびA'はそれぞれ窒素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基であり、BおよびB'はそれぞれ炭素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基である。(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)または置換基を有していてもよい芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基を示す。(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)または置換基を有していてもよい芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。) AとBおよびA' とB' は共有結合によって結合している。EおよびGはそれぞれ炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)または置換基を有していてもよい芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。)を示す。ただし、環状基の置換基としてあるいは

mは1、2または3であり、nは0、1または2である。ただし、m+nは2または3である。部分構造MLmは下記一般式(2)で示され、部分構造ML'nは下記一般式(3)または一般式(4)で示される構造を表す。

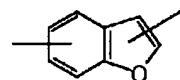
【化2】



(4)

環状基Bとしてあるいは環状基B'として少なくとも一つ以上の下記一般式(5)で示される置換基を有してもよいベンゾフラン環基が存在する。

【化3】



(5)

一般式(5)に示したベンゾフラン環基の2個の結合手のうち左側の結合手は4一位、5一位、6一位または7一位からの単結合を示し、右側の結合手は2一位または3一位からの単結合を示す。このベンゾフラン環基が環状基の置換基である場合、左右どちらかの単結合で環状基A、A'、BあるいはB'とつながっている。また、このベンゾフラン環基が環状基Bあるいは環状基B'である場合、左右どちらかの単結合で環状基Aあるいは環状基A'とつながっている。一般式(5)の置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)、置換基を有していてもよい芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。)を示す。また、ベンゾフラン環の4、5、6および7一位の隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。]

【請求項2】 前記一般式(1)においてnが0である

ことを特徴とする請求項1記載の金属配位化合物。

【請求項3】 前記一般式(1)において、部分構造M_{L'n}が前記一般式(3)で示される構造であることを特徴とする請求項1記載の金属配位化合物。

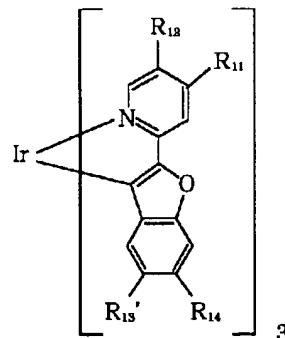
【請求項4】 前記一般式(1)において、部分構造M_{L'n}が前記一般式(4)で示される構造であることを特徴とする請求項1記載の金属配位化合物。

【請求項5】 前記環状基Bおよび環状基B'がそれぞれ独立して置換基を有していてもよい芳香環基であるフェニル基、チエニル基、チアナフチル基、ナフチル基、ピレニル基、9-フルオレノンイル基、フルオレニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基(該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。)、ベンゾフラニル基から選ばれることを特徴とする請求項1に記載の金属配位化合物。

【請求項6】 前記環状基Bおよび環状基B'がそれぞれ独立して置換基を有していてもよいフェニル基またはベンゾフラニル基から選ばれることを特徴とする請求項4に記載の金属配位化合物。

【請求項7】 前記環状基Aおよび環状基A'がそれぞれ独立して置換基を有していてもよい芳香環基であるピリジル基、ピリダジル基、ピリミジル基から選ばれることを特徴とする請求項1に記載の金属配位化合物。

【請求項8】 前記環状基Aおよび環状基A'がそれぞれ独立して置換基を有していてもよいピリジル基から選ばれることを特徴とする請求項7に記載の金属配位化合物。



(6)

[前記Irはイリジウムを示し、置換基R₁₁、R₁₂、R₁₃、R_{13'}、R₁₄はそれぞれ独立して水素原子、フッ素原子、直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基はC_nH_{2n+1}で表され、アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよく、隣接しないメチレン基は酸素原子に置き換わっても良く、n'は1から20の整数を表す)、置換基を有していてもよいフェニル基またはベンゾフラニル基を示す。フェニル基およびベンゾフラニル基の置換基はフッ素原子、直鎖または分岐のアルキル基(該アルキル基はC_nH_{2n+1}で表され、アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよく、隣接しないメチレン基は酸素原子に置き換わって

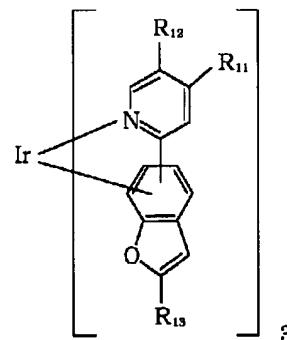
物。

【請求項9】 前記環状基A、A'、BおよびB'が、それぞれ無置換あるいはハロゲン原子、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。)で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。}から選ばれる置換基を有することを特徴とする請求項1に記載の金属配位化合物。

【請求項10】 前記一般式(1)において、Mがイリジウムであることを特徴とする請求項1に記載の金属配位化合物。

【請求項11】 前記一般式(1)で示される化合物は、Mがイリジウムであり、mが3であり、nが0である金属配位化合物であって、下記一般式(6)または(7)で示されることを特徴とする請求項1に記載の金属配位化合物。

【化4】



(7)

も良く、n'は1から20の整数を表す)から選ばれる。]

【請求項12】 前記請求項1乃至11のいずれかに記載の金属配位化合物からなることを特徴とする発光材料。

【請求項13】 基板上に設けられた一对の電極間に、少なくとも一種の有機化合物を含む発光層を備える電界発光素子であって、前記発光層が前記請求項1に記載の一般式(1)で示される金属配位化合物を含むことを特徴とする電界発光素子。

【請求項14】 前記電極間に電圧を印加することにより発光を発光することを特徴とする請求項13に記載の

電界発光素子。

【請求項15】前記請求項13に記載の電界発光素子と、前記電界発光素子に電気信号を供給する手段とを具備した表示装置。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、平面光源や平面状ディスプレイ等に使用される有機発光素子（有機EL素子とも）とその発光材料に関する。

【0002】特に新規の金属配位化合物とそれを用いた発光素子及び表示装置に関するものであり、さらに詳しくは、その新規の金属配位化合物を発光材料として用いることで、発光効率が高く、経時変化が少ない発光素子及び表示装置に関するものである。

【0003】

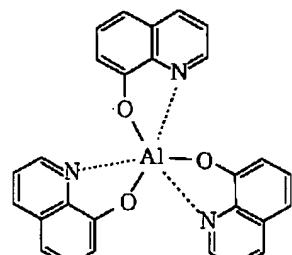
【従来の技術】有機発光素子は、古くはアントラセン蒸着膜に電圧を印加して発光させた例（Thin Solid Films, 94 (1982) 171）等がある。しかし近年、無機発光素子に比べて大面積化が容易であることや、各種新材料の開発によって所望の発色が得られることや、また低電圧で駆動可能であるなどの利点により、さらに高速応答性や高効率の発光素子として、材料開発を含めて、デバイス化のための応用研究が精力的に行われている。

【0004】例えば、Macromol. Symp. 125, 1~48 (1997) に詳述されているように、一般に有機EL素子は透明基板上に形成された、上下2層の電極と、この間に発光層を含む有機物層が形成された構成を持っている。

【0005】発光層には、電子輸送性と発光特性を有するアルミキノリノール錯体、代表例としては、

【0006】

【化5】



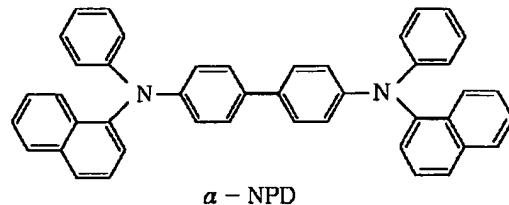
Alq 3

【0007】に示すAlq3などが用いられる。

【0008】またホール輸送層には、例えばトリフェニルジアミン誘導体、代表例としては

【0009】

【化6】



【0010】に示す α -NPDなど、電子供与性を有する材料が用いられる。

【0011】これらの素子は電気的整流性を示し、電極間に電界を印加すると、陰極から電子が発光層に注入され、陽極からはホールが注入される。注入されたホールと電子は、発光層内で再結合して励起子を生じ、これが基底状態に遷移する時発光する。

【0012】この過程で、励起状態には励起1重項状態と3重項状態があり、前者から基底状態への遷移は蛍光と呼ばれ、後者からの遷移は燐光と呼ばれており、これらの状態にある物質を、それぞれ1重項励起子、3重項励起子と呼ぶ。

【0013】これまで検討されてきた有機発光素子は、その多くが1重項励起子から基底状態に遷移するときの蛍光が利用されている。一方最近、三重項励起子を経由した燐光発光を利用する素子の検討がなされている。

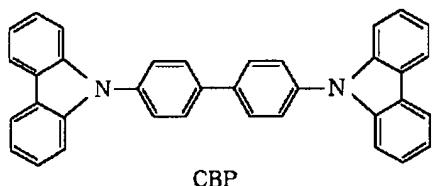
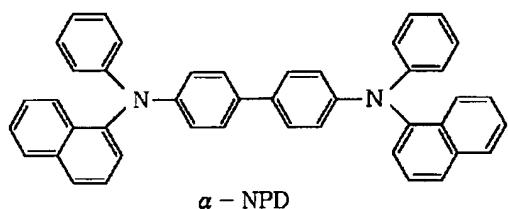
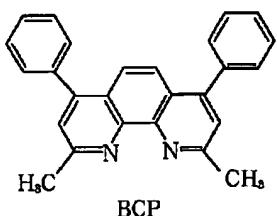
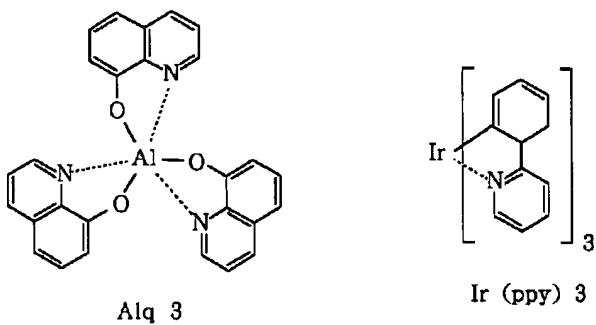
【0014】発表されている代表的な文献は、文献1: Improved energy transfer in electrophosphorescent device (D. F. O'Brien他, Applied Physics Letters Vol 74, No 3 p 422 (1999))

文献2: Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence (M. A. Baldo他, Applied Physics Letters Vol 75, No 1 p 4 (1999))である。

【0015】これらの文献では、電極間に挟持された有機層を4層積層する構成が主に用いられ、用いている材料は、

【0016】

【化7】



【0017】に示すキャリア輸送材料と熒光発光性材料である。

【0018】各材料の略称は以下の通りである。

Alq3:アルミニキノリノール錯体

α -NPD: N4, N4'-Di-naphthale
n-1-yl-N4, N4'-diphenyl-bi
phenyl-4, 4'-diamine

CBP: 4, 4' -N, N' -dicarbazole -biphenyl

BCP: 2, 9-dimethyl-4, 7-diphenyl-1, 10-phenanthroline

PtOEP:白金=オクタエチルポルフィリン錯体

Ir (ppy) 3 : イリジウム-フェニルピリミジン錯体
【0019】文献1、2とも高効率が得られた素子は、ホール輸送層に α -NPD、電子輸送層にAlq3、励起子拡散防止層にBCP、発光層にCBPをホスト材料として、これに発光性材料であるPtOEPまたはIr (ppy) 3を6%程度の濃度で分散混入したもの用いてる素子であった。

【0020】現在燐光性発光材料が特に注目される理由は、以下の理由で原理的に高発光効率が期待できるからである。キャリア再結合により生成される励起子は1重項励起子と3重項励起子からなり、その確率は1:3である。これまでの有機EL素子は、螢光発光を利用していたが、原理的にその発光収率は生成された励起子数に対して、25%でありこれが上限であった。しかし3重項励起子から発生する燐光を用いれば、原理的に少なくとも3倍の収率が期待され、さらにエネルギー的に高い1重項から3重項への項間交差による転移を考え合わせると、原理的には4倍の100%の発光収率が期待できる。

【0021】しかし上記燐光発光を用いた有機発光素子は、一般に蛍光発光型の素子と同様に、発光効率の劣化と素子安定性に関してさらなる改良が求められている。この劣化原因の詳細は不明であるが、本発明者らは燐光発光のメカニズムを踏まえて以下のように考えている。

【0022】有機発光層が、キャリア輸送性のホスト材料と発光発光性のゲストからなる場合、3重項励起子から発光発光にいたる主な過程は、以下のいくつかの過程からなる。

1. 発光層内での電子・ホールの輸送
2. ホストの励起子生成
3. ホスト分子間の励起エネルギー伝達
4. ホストからゲストへの励起エネルギー移動
5. ゲストの3重項励起子生成

6. ゲストの3重項励起子から基底状態遷移と発光発光
【0023】それぞれの過程における所望のエネルギー
移動や発光は、さまざまなエネルギー失活過程との競争
反応である。有機発光素子の発光効率を高めるために
は、発光中心材料そのものの発光量子収率を大きくする
ことは言うまでもない。

【0024】特に熒光発光物質に於いては、一般に前記3重項励起子の寿命が1重項励起子の寿命より3桁以上長いことに由来するものと考えられる。つまりエネルギーの高い励起状態に保持される時間が長いために、周辺物質との反応や、励起子同士での多量体形成などによって、失活過程が起こる確立が多くなり、ひいては物質の変化をきたし、寿命劣化につながり易いと本発明者らは考えている。

〔0025〕

【発明が解決しようとする課題】りん光発光素子に用い
る、発光材料には、高効率発光で、かつ安定性の高い化
合物が望まれている。特に上記エネルギー励起状態での
寿命が長いために、エネルギー失活が起きにくく、かつ
化学的にも安定で素子寿命を長くすることが強く望まれ
ている。

【0026】そこで、本発明は、熒光発光材料を用いて、発光効率が高く、長い期間高輝度を保つことが可能な発光材料を得ること及びそれを用いた電界発光素子及

び表示装置を提供することを目的とする。

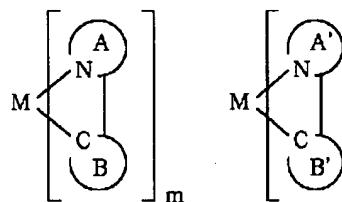
〔0027〕

【課題を解決するための手段】本発明者らは金属配位化合物を発光材料とすることを第一の手段としている。また特にイリジウム錯体に関し、かつ下記一般式(5)で示される環状基を配位子の一部あるいは置換基として持った新規な発光性の金属錯体を提供することにある。

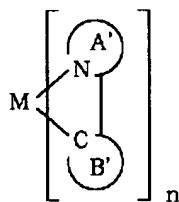
【0028】より具体的には、下記一般式(1)で示されることが特徴とする金属配位化合物である。

〔0029〕

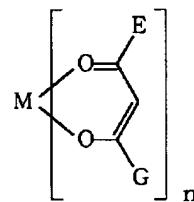
【化8】



(2)



(3)



(4)

【0033】NとCは、窒素原子および炭素原子であり、AおよびA'はそれぞれ窒素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基であり、BおよびB'はそれぞれ炭素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基である。{該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トライアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-〇-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)または置換基を有していてもよい芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基を示す。(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-〇-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。))を示す。}

【0034】AとBおよびA' とB' は共有結合によって結合している。EおよびGはそれぞれ炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）または置換基を有していてもよい芳香環基（該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基（該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。）、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の1つもしくは隣接しない

M L m L' n

(1)

【0030】[式中、MはIr, Pt, RhまたはPdの金属原子であり、LおよびL'は互いに異なる二座配位子を示す。mは1、2または3であり、nは0、1または2である。ただし、m+nは2または3である。]

【0031】部分構造 $M_L m$ は下記一般式(2)で示され、部分構造 $M_L' n$ は下記一般式(3)または一般式(4)で示される構造を表す。

〔0032〕

【化9】

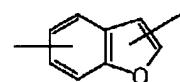
(4)

2つ以上のメチレン基は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。)を示す。

【0035】ただし、環状基の置換基としてあるいは環状基Bとしてあるいは環状基B'をして少なくとも一つ以上の下記一般式(5)で示される置換基を有してもよいベンゾフラン環基が存在する。

〔0036〕

【化10】



(5)

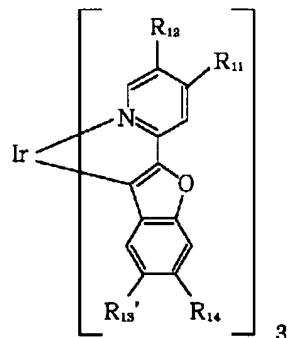
【0037】一般式(5)に示したベンゾフラン環基の2個の結合手のうち左側の結合手は4一位, 5一位, 6一位または7一位からの単結合を示し、右側の結合手は2一位または3一位からの単結合を示す。このベンゾフラン環基が環状基の置換基である場合、左右どちらかの単結合で環状基A、A'、BあるいはB'につながっている。また、このベンゾフラン環基が環状基Bあるいは環状基B'である場合、左右どちらかの単結合で環状基Aあるいは環状基A'につながっている。

【0038】一般式(5)の置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換され

ていてもよい。）、置換基を有していてもよい芳香環基（該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CO-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）を示す。】を示す。また、ベンゾフラン環の4、5、6および7一位の隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。】

【0039】本発明の新規な金属配位化合物は、前記一般式(1)において部分構造ML' nが前記一般式(3)で示されること、前記一般式(1)において部分構造ML' nが前記一般式(4)で示されること、前記一般式(1)においてnが0であることが好ましい。

【0040】また、前記環状基Bおよび環状基B'がそれぞれ独立して置換基を有していてもよい芳香環基であるフェニル基、チエニル基、チアナフチル基、ナフチル基、ピレニル基、9-フルオレノンイル基、フルオレニ



(6)

【0044】【前記Irはイリジウムを示し、置換基R₁₁、R₁₂、R₁₃、R_{13'}、R₁₄はそれぞれ独立して水素原子、フッ素原子、直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基はC_n、H_{2n'+1}で表され、アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよく、隣接しないメチレン基は酸素原子に置き換わっても良く、n'は1から20の整数を表す）、置換基を有していてもよいフェニル基またはベンゾフラン基を示す。フェニル基およびベンゾフラン基の置換基はフッ素原子、直鎖または分岐のアルキル基（該アルキル基はC_n、H_{2n'+1}で表され、アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよく、隣接しないメチレン基は酸素原子に置き換わっても良く、n'は1から20の整数を表す）から選ばれる。】

【0045】また、前記一般式(1)において、Mがイリジウムであり、mが3であり、nが0である金属配位化合物であって、上記一般式(6)で示される金属配位化合物が特により好ましい。

【0046】さらに本発明は、前記一般式(1)で示される金属配位化合物からなることを特徴とする発光材

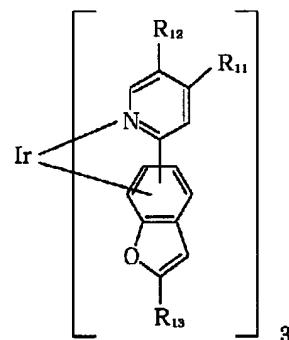
ル基、ジベンゾフラン基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基（該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。）、ベンゾフラン基から選ばれることが好ましく、置換基を有していてもよいフェニル基またはベンゾフラン基から選ばれることがより好ましい。

【0041】また、前記一般式(2)および(3)において環状基AおよびA'がそれぞれ独立して置換基を有していてもよい芳香環基であるピリジル基、ピリダジル基、ピリミジル基から選ばれることが好ましく、それぞれ独立して置換基を有していてもよいピリジル基から選ばれることがより好ましい。また、前記一般式(1)において、Mがイリジウムであることが好ましい。

【0042】また、前記一般式(1)で示される化合物は、Mがイリジウムであり、mが3であり、nが0である金属配位化合物であって、下記一般式(6)または(7)で示される金属配位化合物が好ましい。

【0043】

【化11】



(7)

料を提供することにある。

【0047】さらに本発明は、基体上に設けられた一对の電極間に、少なくとも一種の有機化合物を含む発光部を備える電界発光素子であって、前記発光部が前記一般式(1)で示される金属配位化合物を含むことを特徴とする電界発光素子を提供することにある。前記電極間に電圧を印加することにより熒光を発光することが好ましい。

【0048】さらに本発明は、前記電界発光素子と、前記電界発光素子に電気信号を供給する手段とを具備した表示装置を提供することにある。

【0049】

【発明の実施の形態】以下、本発明を図面に基づいて詳細に説明する。図1は本発明の電界発光素子の代表的な例を示す概略図である。本発明の基本的な素子構成を図1(a)～(c)に示す。

【0050】図1に示したように、本発明の有機EL素子は透明基板15上に、50～200nmの膜厚を持つ透明電極14と、複数層の有機膜層と、及びこれを挟持するように金属電極11が形成されている。

【0051】図1 (a) では、有機層が発光層12とホール輸送層13からなる例を示した。透明電極14としては、仕事関数が大きなITOなどが用いられ、透明電極14からホール輸送層13へホール注入しやすくしている。金属電極11には、アルミニウム、マグネシウムあるいはそれらを用いた合金など、仕事関数の小さな金属材料を用い、有機層への電子注入をしやすくしている。

【0052】発光層12には、本発明の金属配位化合物を用いているが、ホール輸送層13には、例えばトリフェニルジアミン誘導体、代表例としては【化7】に示す α -NPDなど、電子供与性を有する材料も適宜用いることができる。

【0053】以上の様に構成した素子は電気的整流性を示し、金属電極11を陰極に透明電極14を陽極になるように電界を印加すると、金属電極11から電子が発光層12に注入され、透明電極14からはホールが注入される。

【0054】注入されたホールと電子は、発光層12内で再結合して励起子が生じ、発光する。この時ホール輸送層13は電子のブロッキング層の役割を果たし、発光層12とホール輸送層13の間の界面における再結合効率が上がり、発光効率が上がる。

【0055】さらに図1 (b) では、図1 (a) の金属電極11と発光層12の間に、電子輸送層16が設けられている。発光機能と電子及びホール輸送機能を分離して、より効果的なキャリアブロッキング構成にすることで、発光効率を上げている。電子輸送層16としては、例えばオキサジアゾール誘導体などを用いることができる。

$$\frac{\Phi(\text{sample})}{\Phi(\text{st})} = \frac{\text{Sem}(\text{sample}) / \text{labs}(\text{sample})}{\text{Sem}(\text{st}) / \text{labs}(\text{st})}$$

【0062】 $\Phi(\text{sample})$: 試料の燐光量子収率
 $\Phi(\text{st})$: 基準物質の燐光量子収率

$\text{labs}(\text{st})$: 標準試料の励起する波長での吸収係数

$\text{Sem}(\text{st})$: 同じ波長で励起した時の発光スペクトル面積強度

$\text{labs}(\text{sample})$: 目的化合物の励起する波長での吸収係数

$\text{Sem}(\text{sample})$: 同じ波長で励起した時の発光スペクトル面積強度

ここで言う燐光量子収率は $I_r(\text{ppy})^3$ の Φ を標準の1とした相対評価で示している。

【0063】(3) 燐光寿命の測定方法は以下の通りである。

先ず化合物をクロロホルムに溶かし、石英基板上に約 $0.1 \mu\text{m}$ の厚みでスピンドルコートした。これを浜松ホトニクス社製の発光寿命測定装置（商品名、ストリークカ

【0056】また図1 (c) に示すように、陽極である透明電極14側から、ホール輸送層13、発光層12、励起子拡散防止層17、電子輸送層16、及び金属電極11からなる4層構成とすることも望ましい形態である。

【0057】本発明に用いる発光材料としては、前記一般式(1)で示される金属配位化合物が高効率発光し、長い期間高輝度を保ち、通電劣化が小さいことを見出した。

【0058】本発明に用いた金属配位化合物は、りん光性発光をするものであり、最低励起状態が、3重項状態のMLCT* (Metal-to-Ligand charge transfer) 励起状態あるいは $\pi-\pi^*$ 励起状態であると考えられる。これらの状態から基底状態に遷移するときにりん光発光が生じる。

【0059】**測定方法** 以下これから本発明で述べる物性値の測定方法を説明する。

(1) 燐光と螢光の判定方法

燐光の判定方法は、酸素失活するかどうかで判定した。化合物をクロロホルムに溶解し、酸素置換した溶液と窒素置換した溶液に光照射して、蛍光強度を比較すると、酸素置換した溶液は化合物に由来する発光がほとんど見られないのに対し、窒素置換した溶液は蛍光強度が確認できることで区別できる。以下本発明の化合物については、特別の断りがない時は全てこの方法で燐光であることを確認している。

【0060】(2) ここで本発明で用いた燐光量子収率の求め方は、次式で与えられる。

【0061】

【数1】

メラ C4334型) を用い、室温で励起波長 337 nm の窒素レーザー光をパルス照射した。励起パルスが終わった後の発光強度の減衰時間を測定した。

【0064】初期の発光強度を I_0 したとき、 t 秒後の発光強度 I は、発光寿命 τ を用いて以下の式で定義される。

【0065】

【数2】

$$I = I_0 \exp(-t/\tau)$$

【0066】本発明の発光材料の燐光量子収率は、0.11から0.9と高い値が得られ、燐光寿命は0.1~ $40 \mu\text{sec}$ と短寿命であった。

【0067】また燐光寿命が短いことは、有機EL素子にしたときにエネルギー失活が少なく、発光効率を高めるための1つの条件となる。すなわち、燐光寿命が長いと、発光待ち状態の3重項励起状態の分子が多くなり、特に高電流密度時に発光効率が低下すると言う問題がある。

った。本発明の発光材料は、高い発光量子収率を有し、短かい発光寿命をもつEL素子の発光材料に適した材料である。

【0068】そこで本発明者らは種々の検討を行い、前記一般式(1)で示される金属配位化合物を発光中心材料に用いた有機EL素子が高効率発光で、長い期間高輝度を保ち、通電劣化が小さいことを見出した。

【0069】前記一般式(1)で示される金属配位化合物のうちnは好ましくは0または1であり、より好ましくは0である。また部分構造ML'nが前記一般式(5)で示される芳香環基を有する場合が好ましい。

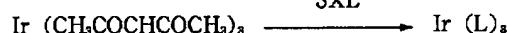
【0070】また、本発明の特徴である前記一般式(5)で示されるベンゼンフラン環基を有することにより

（5）で示されている（アノアノン環基を有することによ）発光波長を調節する（特に長波長化）ことが可能となる。さらに前記一般式（5）で示される芳香環基が存在することで本発明の金属配位化合物の有機溶媒に対する溶解性が増し、再結晶やカラムクロマトでの精製が容易である。以上のような観点からも、本発明の金属配位化合物は有機EL素子の発光材料として適している。

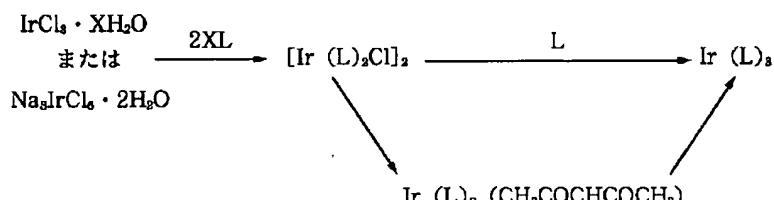
【0071】さらに、以下の実施例に示すように、通電耐久試験において、本発明の化合物は、安定性においても優れた性能を有することが明らかとなった。本発明の特徴である前記一般式(5)で示されるベンゾフラン環基が導入されたことによる分子間相互作用の変化により、ホスト材料などとの分子間相互作用を制御することができ、熱失活の原因となる励起会合体形成の抑制が可能になったと考えられ、消光過程が減少したりすることにより、熒光量子収率が向上して、素子特性が向上したものと考えている。

【0072】本発明の発光素子は、図1に示す様に、一般式(1)で示される金属配位化合物を含む層が、対向する2つの電極に狭持され、該電極間に電圧を印加することにより発光する電界発光素子であることが好ましい。

【0073】本発明で示した高効率な発光素子は、省エネ



あるいは



【0079】ここでXLのXは上記イリジウムに配位すべき所望の配位子を示す

【0080】以下、本発明に用いられる金属配位化合物の具体的な構造式を表1～表13に示す。ただし、これらは、代表例を例示しただけで、本発明は、これに限定

エネルギーや高輝度が必要な製品に応用が可能である。応用例としては表示装置・照明装置やプリンターの光源、液晶表示装置のバックライトなどが挙げられる。表示装置としては、省エネルギー・高視認性・軽量なフラットパネルディスプレイが可能となる。また、プリンターの光源としては、現在広く用いられているレーザビームプリンタのレーザー光源部を、本発明の発光素子に置き換えることができる。独立にアドレスできる素子をアレイ上に配置し、感光ドラムに所望の露光を行うことで、画像形成する。本発明の素子を用いることで、装置体積を大幅に減少することができる。照明装置やバックライトに関しては、本発明による省エネルギー効果が期待できる。

【0074】ディスプレイへの応用では、アクティブマトリクス方式である TFT 駆動回路を用いて駆動する方式が挙げられる。以下、図2を参照して、本発明の素子において、アクティブマトリクス基板を用いた例について説明する。

【0075】図2は、有機EL素子と駆動手段を備えたパネルの構成の一例を模式的に示したものである。パネルには、走査信号ドライバー、情報信号ドライバー、電流供給源が配置され、それぞれゲート選択線、情報信号線、電流供給線に接続される。ゲート選択線と情報信号線の交点には画素回路が配置される。走査信号ドライバーは、ゲート選択線G1、G2、G3...Gnを順次選択し、これに同期して情報信号ドライバーから画像信号が印加される。

【0076】本発明の発光材料を発光層に用いた表示パネルを上記のように駆動することにより、良好な画質で、長時間表示にも安定な表示が可能になる。

【0077】《合成経路の簡単な説明》本発明で用いられる前記一般式(1)で示される金属配位化合物の合成経路をイリジウム配位化合物を例として示す。

【0078】

【化12】

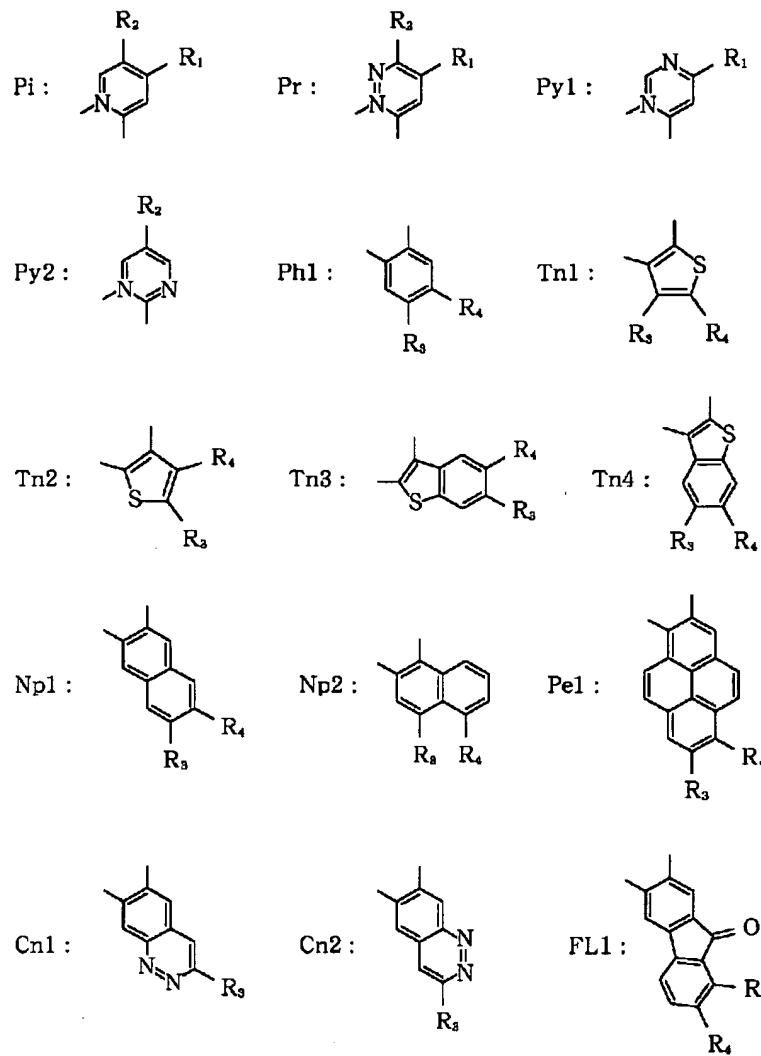


されるものではない。

【0081】表1～表13の環構造A, A', BおよびB'に使用しているP_i～B_f6は化13～化14に示した構造を表している。

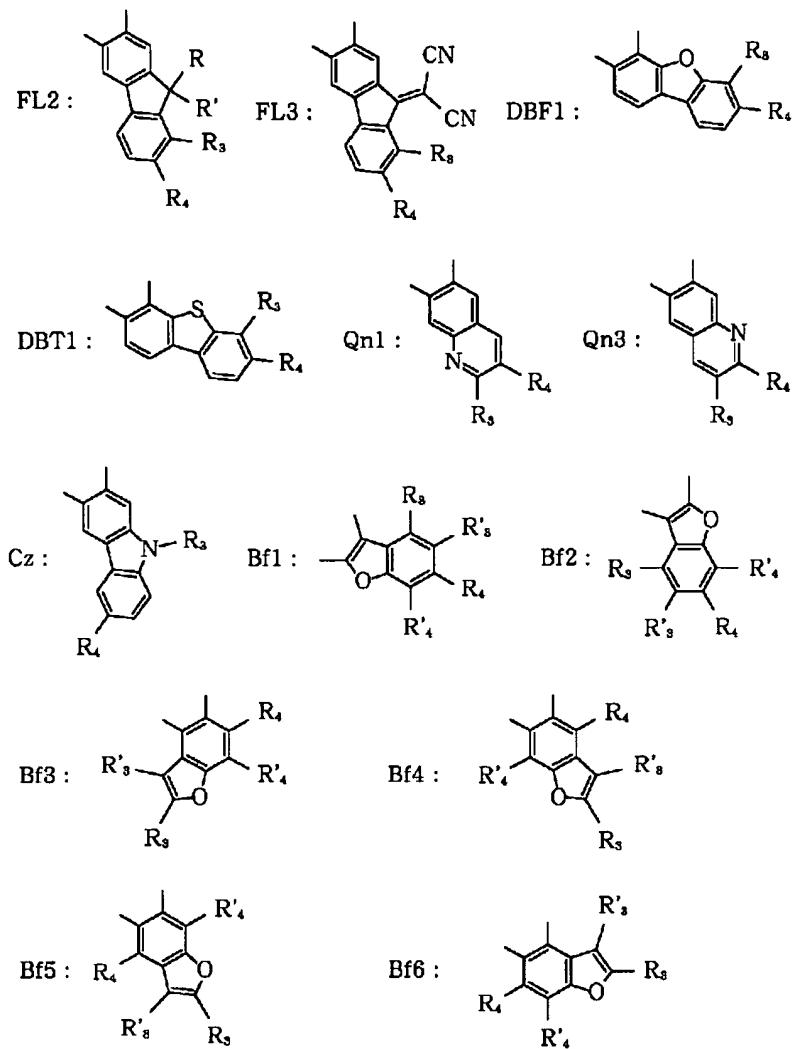
[0082]

【化13】



【0083】

【化14】

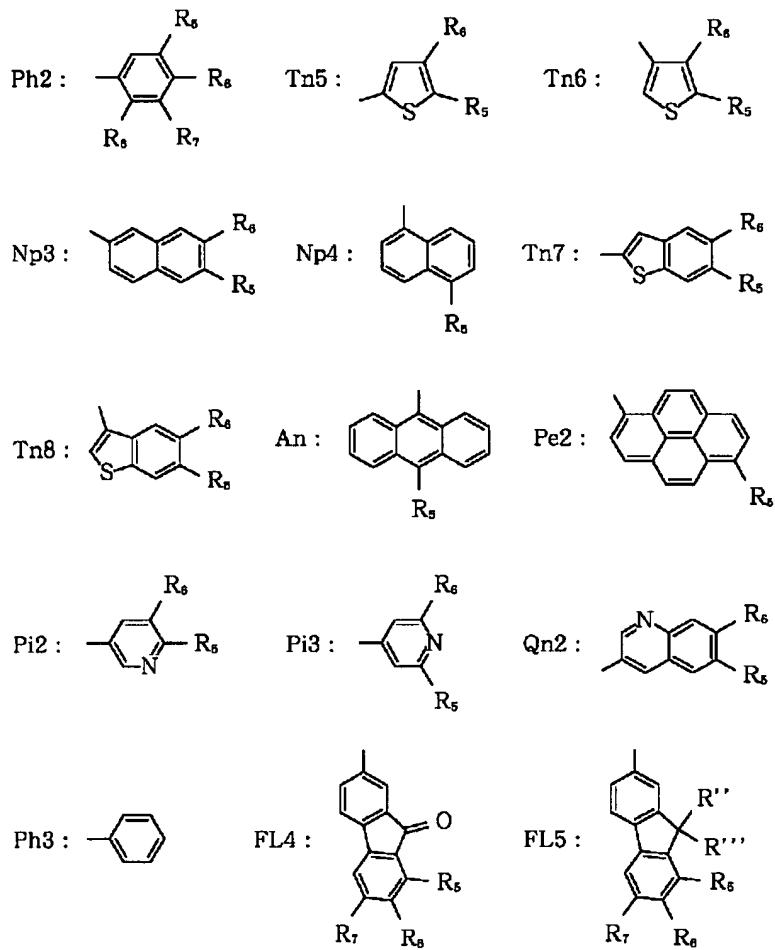


【0084】また、表1～表13の環構造A、A'、BおよびB'の置換基として存在する芳香環基に使用しているPh2～Bf8は化15～化16に示した構造を表

している。

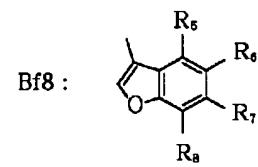
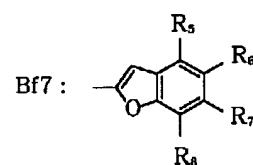
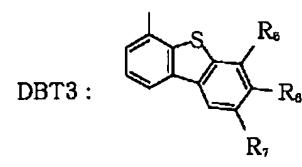
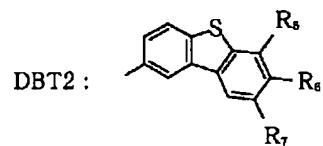
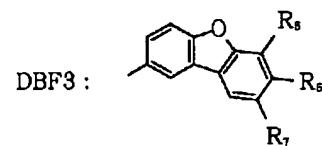
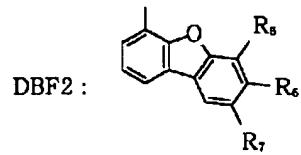
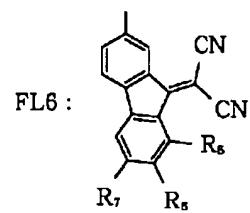
【0085】

【化15】



【0086】

【化16】



【0087】

【表1】

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A			
						B-R3		B-R4		B-R'3		B-R'4	
						B-R3		B-R4		B-R'3		B-R'4	
						R5	R6	R7	R8	R5	R6	R7	R8
1	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	H	H	H	-	-	-	-
2	Ir	3	0	Pi		H	H	H	H	-	-	-	-
3	Ir	3	0	Pi	Bf1	CF ₃		H		-	-	-	-
4	Ir	3	0	Pi		H	H	H	H	-	-	-	-
5	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		NO ₂		-	-	-	-
6	Ir	3	0	Pi		H	H	H	H	-	-	-	-
7	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		F	F	-	-	-	-
8	Ir	3	0	Pi		H	H	H	H	-	-	-	-
9	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		CN		-	-	-	-
10	Ir	3	0	Pi		H	H	H	H	-	-	-	-
11	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		Ph2	H	H	H	H	H
12	Ir	3	0	Pi		H	H	H	H	-	-	-	-
13	Ir	3	0	Pi	Bf1	Ph2		H	H	-	-	-	-
14	Ir	3	0	Pi		H		Np4	H	-	-	-	-
15	Ir	3	0	Pi	Bf1	Tn7		H	H	-	-	-	-
16	Ir	3	0	Pi		H	H	H	H	-	-	-	-
17	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		C ₄ H ₉	H	-	-	-	-
18	Ir	3	0	Pi		H	H	OCH ₃	H	-	-	-	-
19	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		Cl	H	-	-	-	-
20	Ir	3	0	Pi		H	H	F	H	-	-	-	-
21	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		C ₈ H ₁₇	H	-	-	-	-
22	Ir	3	0	Pi		H	H	NO ₂	H	-	-	-	-
23	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		Ph2	H	H	H	H	H
24	Ir	3	0	Pi		H	H	Ph2	H	H	H	H	H
25	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		Ph2	H	H	H	H	H
26	Ir	3	0	Pi		H	H	Br	H	-	-	-	-
27	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		Bf1	H	H	H	H	H
28	Ir	3	0	Pi		H	H	OC ₄ H ₉	H	H	-	-	-
29	Ir	3	0	Pi	Bf1	H		Ph2	H	OCH ₂ C ₆ F ₁₁	H	H	H
30	Ir	3	0	Pi		H	H	Br	H	H	-	-	-
						H		Si(C ₈ H ₁₇) ₃	H	H	-	-	-

【0088】

【表2】

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A			
						B-R3		B-R4		B-R'3		B-R'4	
						R5		R6		R7		R8	
31	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		H		-	-	-	-
32	Ir	3	0	Pi	Bf2	CF ₃		H		-	-	-	-
33	Ir	3	0	Pi	Bf2	CF ₃		CF ₃		-	-	-	-
34	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		CF ₃		-	-	-	-
35	Ir	3	0	Pi	Bf2	Ph2		H		H	H	H	H
36	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Np4		H	-	-	-
37	Ir	3	0	Pi	Bf2	Tn7		H		H	H	-	-
38	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		CF ₃		-	-	-	-
39	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		H		-	-	-	-
40	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Ph2	H	H	Si(C ₂ H ₅) ₂	H	H
41	Ir	3	0	Pi	Bf2	Ph2		H		H	H	H	H
42	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Np3		H	H	-	-
43	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Np4		H	-	-	-
44	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Pe2		H	-	-	-
45	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Qn2		H	H	-	-
46	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		An		H	-	-	-
47	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Bf7		H	H	H	H
48	Ir	3	0	Pi	Bf2	Tn5		H		H	H	-	-
49	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Bf8		H	H	H	H
50	Ir	3	0	Pi	Bf2	H		Tn6		H	H	-	-
51	Ir	3	0	Pi	Bf3	H		H		-	-	-	-
52	Ir	3	0	Pi	Bf3	Ph2	H	H	H	H	OCH ₃	H	H
53	Ir	3	0	Pi	Bf3	Ph2	H	H	H	H	C ₆ H ₁₃	H	H
54	Ir	3	0	Pi	Bf3	Np3	H	H	H	H	H	-	-
55	Ir	3	0	Pi	Bf3	CF ₃		H		-	-	-	-
56	Ir	3	0	Pi	Bf3	C ₂ H ₅	H	H	H	-	-	-	-
57	Ir	3	0	Pi	Bf3	CF ₃		CF ₃		-	-	-	-
58	Ir	3	0	Pi	Bf3	C ₁₀ H ₂₁	H	H	H	-	-	-	-
59	Ir	3	0	Pi	Bf3	H		CF ₃		-	-	-	-
60	Ir	3	0	Pi	Bf3	Np3	H	H	H	H	H	-	-
						H		H		-	-	-	-
						Np4	H	H	H	H	-	-	-

【0089】

【表3】

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A			
						B-R3		B-R4		B-R3		B-R4	
						B-R3		B-R4		B-R3		B-R4	
61	Ir	3	0	Pi	Bf4	H		CF ₃		-	-	-	-
62	Ir	3	0	Pi	Bf4	Ph ₂	H	H	H	H	C ₆ H ₁₃	H	H
63	Ir	3	0	Pi	Bf4	H		H		-	-	-	-
64	Ir	3	0	Pi	Bf4	Ph ₂	H	H	H	H	H	H	H
65	Ir	3	0	Pi	Bf4	Ph ₂	H	H	H	H	H	H	H
66	Ir	3	0	Pi	Bf4	Ph ₂	H	H	H	H	H	H	H
67	Ir	3	0	Pi	Bf4	H		H		-	-	-	-
68	Ir	3	0	Pi	Bf4	DBT2	H	H	H	H	H	H	H
69	Ir	3	0	Pi	Bf4	Ph ₂	H	H	H	H	H	H	H
70	Ir	3	0	Pi	Bf4	H		Pi3		H	H	-	-
71	Ir	3	0	Pi	Bf5	Ph ₂	H	H	H	H	H	H	H
72	Ir	3	0	Pi	Bf5	H		CF ₃		-	-	-	-
73	Ir	3	0	Pi	Bf5	Ph ₂	H	H	H	H	C ₆ H ₁₃	H	H
74	Ir	3	0	Pi	Ph1	H		BF7		H	H	H	H
75	Ir	3	0	Pi	Ph1	H		BF7		H	H	H	H
76	Ir	3	0	Pi	Tn1	H	OCH ₃		BF7	H	H	H	H
77	Ir	3	0	Pi	Np2	H		BF7		H	H	H	H
78	Ir	3	0	Pi	Cn1	H		BF7		H	H	H	H
79	Ir	3	0	Pi	DBT1	H		BF7		H	H	H	H
80	Ir	3	0	Pi	Ph1	H		BF8		H	H	H	H
81	Ir	3	0	Pi	Ph1	H		BF8		H	H	H	H
82	Ir	3	0	Pi	Tn2	H		BF8		H	H	H	H
83	Ir	3	0	Pi	Np2	H		BF8		H	H	F	H
84	Ir	3	0	Pi	Cn1	H		BF8		H	H	H	H
85	Ir	3	0	Pi	Cz	H		BF8		H	H	H	H
86	Ir	3	0	Pr	Bf1	CH ₃	H		-	-	-	-	-
87	Ir	3	0	Py1	Bf1	H		H		-	-	-	-
88	Ir	3	0	Py2	Bf1	H		H		-	-	-	-
89	Ir	3	0	Pr	Bf2	H		H		-	-	-	-
90	Ir	3	0	Py1	Bf2	H		H		-	-	-	-

【0090】

【表4】

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A			
						B-R3	B-R3	B-R4	B-R4	R5	R6	R7	R8
						B				R5	R6	R7	R8
91	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	H	-	-	-	-	-	-
92	Ir	3	0	Pi	Bf1	-CH=CH2-	H	H	-	-	-	-	-
93	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	H	-	-	-	-	-	-
94	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-
95	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-
96	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-
97	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	Np4	H	-	-	-	-	-
98	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	Ph2	H	OCH=CHC ₂ H ₅	H	H	-	-
99	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	Ph2	H	OC≡CC ₈ H ₇	H	H	-	-
100	Ir	3	0	Pi	Bf1	Ph2	H	H	H	H	H	H	-
101	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	H	-	-	-	-	-	-
102	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	H	-	-	-	-	-	-
103	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	H	-	-	-	-	-	-
104	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	Np4	H	-	-	-	-	-
105	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	Ph2	H	H	F	F	-	-
106	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	Np3	H	H	-	-	-	-
107	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	An	H	-	-	-	-	-
108	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	P _o 2	H	-	-	-	-	-
109	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	Cl	-	-	-	-	-	-
110	Ir	3	0	Pi	Bf1	-CH=CH2-	H	H	-	-	-	-	-
111	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	P ₃	H	H	-	-	-	-
112	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	Qn2	H	H	-	-	-	-
113	Ir	3	0	Pi	Bf1	-CH=CH2-	H	H	-	-	-	-	-
114	Ir	3	0	Pi	Bf1	H	Ph2	H	CN	H	H	-	-
115	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	-CH=CH2-	H	-	-	-	-	-
116	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	Tn5	H	H	-	-	-	-
117	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	-CH=CH2-	H	-	-	-	-	-
118	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	Tn6	H	H	-	-	-	-
119	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	-CH=CH2-	-	-	-	-	-	-
120	Ir	3	0	Pi	Bf2	H	Ph2	NO ₂	H	H	H	-	-
						H	-CH=CH2-	-	-	-	-	-	-
						H	DBF3	H	H	H	H	-	-
						H	-CH=CH2-	-	-	-	-	-	-

【0091】

【表5】

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A							
						B-R3	B-R3	B-R4	B-R4	R5		R6		R7		R8	
										R5		R6		R7		R8	
121	Rh	3	0	P1	Bf1	H		H		-	-	-	-	-	-	-	
122	Rh	3	0	P1	Bf1	H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	-	
123	Rh	3	0	P1	Bf1	CF ₃		H		-	-	-	-	-	-	-	
124	Rh	3	0	P1	Bf1	H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	-	
125	Rh	3	0	P1	Bf1	H		NO ₂		-	-	-	-	-	-	-	
126	Rh	3	0	P1	Bf1	H		Cl		-	-	-	-	-	-	-	
127	Rh	3	0	P1	Bf1	H		F	F	-	-	-	-	-	-	-	
128	Rh	3	0	P1	Bf1	H		CN		-	-	-	-	-	-	-	
129	Rh	3	0	P1	Bf1	H		OCH ₃		-	-	-	-	-	-	-	
130	Rh	3	0	P1	Bf1	H		Ph2	H	H	H	H	H	H	H	H	
131	Rh	3	0	P1	Bf2	H		H	H	-	-	-	-	-	-	-	
132	Rh	3	0	P1	Bf2	H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	-	
133	Rh	3	0	P1	Bf2	CF ₃		CF ₃		-	-	-	-	-	-	-	
134	Rh	3	0	P1	Bf2	H		CF ₃		-	-	-	-	-	-	-	
135	Rh	3	0	P1	Bf2	Ph2	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
136	Rh	3	0	P1	Bf2	H		Np4	H	-	-	-	-	-	-	-	
137	Rh	3	0	P1	Bf2	Tn7		H	H	H	H	H	H	H	H	H	
138	Rh	3	0	P1	Bf2	H	H	C ₆ H ₅	H	-	-	-	-	-	-	-	
139	Rh	3	0	P1	Bf2	H	H	H		-	-	-	-	-	-	-	
140	Rh	3	0	P1	Bf2	H		OCH ₃	H	-	-	-	-	-	-	-	
141	Pt	2	0	P1	Bf1	H		Ph2	H	H	H	Si(C ₂ H ₅) ₃	H	H	H	H	
142	Pt	2	0	P1	Bf1	H		-(CH=CH)2-	H	H	-	-	-	-	-	-	
143	Pt	2	0	P1	Bf1	H		-(CH=CH)2-	H	-	-	-	-	-	-	-	
144	Pt	2	0	P1	Bf2	H		Tn5	H	H	-	-	-	-	-	-	
145	Pt	2	0	P1	Bf2	H		Tn6	H	H	-	-	-	-	-	-	
146	Pt	2	0	P1	Bf2	H		-(CH=CH)2-	-	-	-	-	-	-	-	-	
147	Pt	2	0	P1	Bf2	H		P12	H	H	-	-	-	-	-	-	
148	Pd	2	0	P1	Bf4	H		-(CH=CH)2-	-	-	-	-	-	-	-	-	
149	Pd	2	0	P1	Bf5	H		P13	H	H	-	-	-	-	-	-	
150	Pd	2	0	P1	Bf1	Ph2	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H	-	-	-	
						H		CF ₃	-	-	-	-	-	-	-	-	
						H		Ph2	H	H	H	Si(C ₂ H ₅) ₃	H	H	H	H	

【0092】

【表6】

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A			
						B-R3	B-R4	B-R'3	B-R'4	R5	R6	R7	R8
				A'-R1		A'-R2		B'				A'	
				B'-R3	B'-R4	B'-R'3	B'-R'4	R5	R6	R7	R8	B'	
151	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
152	Ir	2	1	Pi	Bf1	CF ₃	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
153	Ir	2	1	Pi	Bf1	CF ₃	CF ₃	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
154	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	CF ₃	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
155	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	CF ₃	H	H	-	-	-	-
				Pi	N ₂	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
156	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Ph2	H	H	H	H	H	H
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
157	Ir	2	1	Pi	Bf2	H	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
158	Ir	2	1	Pi	Bf2	CF ₃	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
159	Ir	2	1	Pi	Bf2	CF ₃	CF ₃	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
160	Ir	2	1	Pi	Bf2	H	CF ₃	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
161	Ir	2	1	Pi	Bf2	H	CF ₃	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	CF ₃	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
162	Ir	2	1	Pi	Bf2	H	Ph2	H	H	H	H	H	H
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
163	Ir	2	1	Pi	Bf2	Ph2	H	H	H	H	H	H	H
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
164	Ir	2	1	Pi	Bf2	Tn7	H	H	H	H	H	H	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-
165	Ir	2	1	Pi	Bf2	H	CF _b	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H	H	H	H	-	-	-	-
					H	H	-	-	-	-	-	-	-

【0093】

【表7】

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A			
						B-R3	B-R4	B-R'3	B-R'4	R5	R6	R7	R8
				A'	B'	A'-R1		A'-R2		B'			
						B'-R3	B'-R4	B'-R3	B'-R4	R5	R6	R7	R8
166	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		H		-	-	-	-
						H	H	Ph2	H	H	Si(C ₂ H ₅) ₃	H	H
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
167	Ir	2	1	Pi	Bf2	Ph2		H		H	H	H	H
						H	H	Ph2	H	H	H	H	H
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
168	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		Qn2		H	H	-	-
						H	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
169	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		Bf7		H	H	H	H
						H	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
170	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		Bf8		H	H	H	H
						H	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
171	Ir	2	1	Pi	Bf3	H		H		-	-	-	-
						Ph2	H	H	H	H	OCH ₃	H	H
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
172	Ir	2	1	Pi	Bf3	H		CF ₃		-	-	-	-
						Np3	H	H	H	H	H	-	-
				Pr	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
173	Ir	2	1	Pi	Bf4	H		CF ₃		-	-	-	-
						Ph2	H	H	H	H	OCH ₃	H	H
				Py1	Ph1	H		-	-	-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
174	Ir	2	1	Pi	Bf4	H		Bf7		H	H	H	H
						Ph2	H	H	H	H	H	H	H
				Py2	Ph1	-		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
175	Ir	2	1	Pi	Ph1	H		Bf7		H	H	H	H
						H	OCH ₃	-	-	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
176	Ir	2	1	Pi	Np2	H		Bf7		H	H	H	H
						H	H	-	-	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
177	Ir	2	1	Pi	Tn2	H		Bf8		H	H	H	H
						H	H	-	-	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
178	Ir	2	1	Pi	On1	H		Bf8		H	H	H	H
						H	-	-	-	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		Np3		H	H	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
179	Ir	2	1	Pi	Bf1	H		H		-	-	-	-
						-	(CH=CH)2-	H	H	-	-	-	-
				Pi	Np2	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
180	Ir	2	1	Pi	Bf1	H		H		-	-	-	-
						H	-	(CH=CH)2-	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		CF ₃		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A				
						B-R3		B-R4		B-R3		B-R4		
						A'-R1		A'-R2		B'-R3		B'-R4		
						B'-R3	B'-R4	B'-R3	B'-R4	A'	R5	R6	R7	R8
181	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	H	-	-	-	-	-	-	-
						H	H	-C≡CH-2-	-	-	-	-	-	-
182	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-	-
						H	H	H	H	-	-	-	-	-
183	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-	-
						H	-C≡CH-2-	H	-	-	-	-	-	-
184	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-	-
						H	-C≡CH-2-	-	-	-	-	-	-	-
185	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Np4	H	-	-	-	-	-	-
						-C≡CH-2-	H	H	-	-	-	-	-	-
186	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Ph2	H	OCH=CHC ₂ H ₁₅	H	H	H	H	H
						-C≡CH-2-	H	H	-	-	-	-	-	-
187	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-	-
						H	-C≡CH-2-	H	-	-	-	-	-	-
188	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Ph2	H	H	H	H	H	H	H
						H	-C≡CH-2-	-	-	-	-	-	-	-
189	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-	-
						H	-C≡CH-2-	H	-	-	-	-	-	-
190	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Ph2	H	-C≡CC ₂ H ₁₇	H	H	H	H	H
						H	-C≡CH-2-	H	-	-	-	-	-	-
191	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Np2	H	-	-	-	-	-	-
						H	H	H	-	-	-	-	-	-
192	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Np4	H	-	-	-	-	-	-
						H	-C≡CH-2-	-	-	-	-	-	-	-
193	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	CF ₃	-	-	-	-	-	-	-
						H	-C≡CH-2-	-	-	-	-	-	-	-
194	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Np3	H	-	-	-	-	-	-
						H	-C≡CH-2-	H	-	-	-	-	-	-
195	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	An	H	-	-	-	-	-	-
						H	-C≡CH-2-	H	-	-	-	-	-	-
						H	CF ₃	-	-	-	-	-	-	-

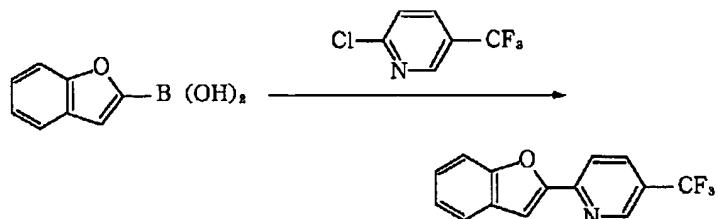
No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A			
						B-R3	B-R4	B-R3	B-R4	R5	R6	R7	R8
						A'-R1		A'-R2		R5	R6	R7	R8
196	Ir	2	1	Pi	Bf1	H	Pe2	H	—	—	—	—	—
						H H	-(CH=CH)2-	—	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H	CF ₃	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf1	H	Cl	—	—	—	—	—	—
						-(CH=CH)2-	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf1	H	Tn8	H	H	—	—	—	—
						H H	-(CH=CH)2-	H	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf1	H	Pe3	H	H	—	—	—	—
						H H	-(CH=CH)2-	—	—	—	—	—	—
				Pi	DBT1	H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf1	H	Qn2	H	H	—	—	—	—
						-(CH=CH)2-	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf1	H	Ph2	H	OCOC ₂ H ₅	H	H	—	—
						-(CH=CH)2-	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	CF ₃	—	—	—	—	—	—
						H H	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf1	H	Ph2	H	CN	H	H	—	—
						-(CH=CH)2-	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H H	CF ₃	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	Tn8	H	H	—	—	—	—
						H H	-(CH=CH)2-	—	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	Ph2	H	NO ₂	H	H	H	H
						H H	-(CH=CH)2-	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	DBF3	H	H	H	H	—	—
						-(CH=CH)2-	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	CF ₃	—	—	—	—	—	—
						H H	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	Ph2	H	H	Si(C ₂ H ₅) ₂	H	H	—
				Pi	Ph1	H H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	Pe2	H	—	—	—	—	—
						H H	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H	CF ₃	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	An	H	—	—	—	—	—
						H H	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—
				Pi	Bf2	H	Br8	H	H	H	H	H	H
						H H	H H	—	—	—	—	—	—
				Pi	Ph1	H	H	—	—	—	—	—	—
						H H	—	—	—	—	—	—	—

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A				
						B-R3 B-R4		B-R3 B-R4		R5 R6 R7 R8				
						A'-R1		A'-R2		B				
						B'-R3 B'-R4		B'-R3 B'-R4		A'				
										B'				
										R5 R6 R7 R8				
211	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		H		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
212	Ir	1	2	Pi	Bf1	CF ₃		H		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
213	Ir	1	2	Pi	Bf1	CF ₃		CF ₃		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
214	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		CF ₃		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
215	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		CF ₃		-	-	-		
				Pi	Np2	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
216	Ir	1	2	Pi	Bf2	H		H		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
217	Ir	1	2	Pi	Bf2	CF ₃		H		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
218	Ir	1	2	Pi	Bf2	CF ₃		CF ₃		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
219	Ir	1	2	Pi	Bf2	H		CF ₃		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
220	Ir	1	2	Pi	Bf2	H		CF ₃		-	-	-		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						CF ₃		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
221	Ir	1	2	Pi	Bf2	H		Ph2	H	H	H	H		
				Pi	Ph1	H H		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
222	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		H		-	-	-		
				Pi	Np2	-(CH=CH)2-		H H		-	-	-		
						H		H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
223	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		H		-	-	-		
				Pi	Ph1	H -(CH=CH)2-		H		-	-	-		
						H		CF ₃		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		
224	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		CF ₃		-	-	-		
				Pi	Bf2	H H		-(CH=CH)2-		-	-	-		
						H		CF ₃		-	-	-		
						H H		H H		-	-	-		
225	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		Np4	H	-	-	-		
				Pi	Ph1	-(CH=CH)2-		H H		-	-	-		
						H H		-	-	-	-	-		

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A			
						B-R3		B-R4		B-R3		B-R4	
						A'		B'		A'-R1		A'-R2	
						B'-R3	B'-R4	B'-R3	B'-R4	B'-R3	B'-R4	B'	B'
226	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		Ph2		H	OCH=CHC ₂ H ₅	H	H
						-(CH=CH)2-		H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		CF ₃		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
227	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		Ph2		H	OQ≡CC ₂ H ₅	H	H
						H	-(CH=CH)2-	H		-	-	-	-
				Pi	Np2	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
228	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		Qn2		H	H	-	-
						-(CH=CH)2-		H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
229	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		Ph2		H	OCOC ₂ H ₅	H	H
						-(CH=CH)2-		H	H	-	-	-	-
				Pi	Bf2	H		CF ₃		-	-	-	-
						H	H	H	H	-	-	-	-
230	Ir	1	2	Pi	Bf1	H		Ph2		H	CN	H	H
						H	-(CH=CH)2-	H		-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		CF ₃		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
231	Ir	1	2	Pi	Bf2	H		Tr6		H	H	-	-
						H	H	-(CH=CH)2-		-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
232	Ir	1	2	Pi	Bf2	H		Ph2		NO ₂	H	H	H
						H	H	-(CH=CH)2-		-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
233	Ir	1	2	Pi	Bf2	H		DBF3		H	H	H	-
						H	H	-(CH=CH)2-		-	-	-	-
				Pi	Bf2	H		CF ₃		-	-	-	-
						H	H	H	H	-	-	-	-
234	Ir	1	2	Pi	Bf2	Ph2		H		H	H	H	H
						H	H	Ph2	H	H	H	H	H
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
235	Rh	1	2	Pi	Bf2	H		Pe2		H	-	-	-
						H	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		CF ₃		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
236	Rh	1	2	Pi	Bf2	H		An		H	-	-	-
						H	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
237	Rh	1	2	Pi	Bf2	H		Br8		H	H	H	H
						H	H	H	H	-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
238	Rh	1	2	Pi	Bf1	Ph2		H		H	H	H	H
						H	H	-(CH=CH)2-		-	-	-	-
				Pi	Bf2	H		CF ₃		-	-	-	-
						H	H	H	H	-	-	-	-
239	Pt	1	1	Pi	Bf2	H		H		-	-	-	-
						H	-(CH=CH)2-	H		-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-
240	Pd	1	1	Pi	Bf2	H		H		-	-	-	-
						H	H	-(CH=CH)2-		-	-	-	-
				Pi	Ph1	H		H		-	-	-	-
						H	H	-	-	-	-	-	-

Nb	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A						
						B-R3	B-R4	B-R3	B-R4	R5	R6	R7	R8			
				E		R'	R''			B		R5		R6		
				G		R'	R''			R7		R8		R7		
241	Ir	2	1	Pi	Bf1	H		H		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				CH ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
				CH ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
242	Ir	2	1	Pi	Bf1	CF ₃		H		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				CF ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
				CF ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
243	Ir	2	1	Pi	Bf1	CF ₃		CF ₃		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				CH ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
				CH ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
244	Ir	2	1	Pi	Bf1	H		CF ₃		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				Ph2		-	-			H	H	H	H			
				Ph2		-	-			H	H	H	H			
245	Ir	2	1	Pi	Bf1	H		Ph2		H	H	H	H			
						H	H	H	H	-	-	-	-			
				Ph2		-	-			H	C ₂ H ₅	H	H			
				Ph2		-	-			H	C ₂ H ₅	H	H			
246	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		H		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				CH ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
				FL5	CH ₃	CH ₃				H	H	H	H			
247	Ir	2	1	Pi	Bf2	CF ₃		H		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				Tn5		-	-			H	H	-	-	-	-	
				Tn5		-	-			H	H	-	-	-	-	
248	Ir	2	1	Pi	Bf2	CF ₃		CF ₃		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				Tn6		-	-			H	H	-	-	-	-	
				Tn6		-	-			H	H	-	-	-	-	
249	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		CF ₃		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				CH ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
				CH ₃		-	-			-	-	-	-	-	-	
250	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		Ph2		H	H	H	H			
						H	H	H	H	-	-	-	-			
				CF ₃		-	-			-	-	-	-			
				CF ₃		-	-			-	-	-	-			
251	Ir	2	1	Pi	Bf2	Ph2		H		H	H	H	H			
						H	H	H	H	-	-	-	-			
				Np3		-	-			OH ₂	H	-	-			
				Np3		-	-			CHO	H	-	-			
252	Ir	2	1	Pi	Bf2	Tn7		H		H	H	-	-			
						H	H	H	H	-	-	-	-			
				Np4		-	-			F	-	-	-			
				Np4		-	-			F	-	-	-			
253	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		C ₂ H ₅		-	-	-	-	-	-	
						H	H	H	H	-	-	-	-	-	-	
				Tn7		-	-			CH ₃	H	-	-			
				Tn7		-	-			CH ₃	H	-	-			
254	Ir	2	1	Pi	Bf2	H		H		-	-	-	-	-	-	
						H	H	Ph2	H	H	H	Si(C ₂ H ₅) ₃	H	H		
				Tn8		-	-			H	H	-	-			
				Tn8		-	-			H	H	-	-			
255	Ir	2	1	Pi	Bf2	Ph2		H		H	H	H	H			
						H	H	Ph2	H	H	H	-	-	-	-	
				Pe2		-	-			H	H	-	-	-	-	
				Pe2		-	-			H	H	-	-	-	-	

No	M	m	n	A	B	A-R1		A-R2		A											
						B-R3		B-R4		B-R3	B-R4	R5		R6		R7		R8			
						E		R''				H		H		H		H			
						G		R''				H		H		H		H			
256	Ir	2	1	P1	Bf2	H		H		Bf7	H	H		H		H		H			
						H		H				H		H		H		H			
						-		-				H		H		H		-			
						-		-				H		H		H		-			
257	Ir	2	1	P1	Bf2	H		H		Bf8	H	H		H		H		H			
						H		H				H		H		H		H			
						-		-				CH ₃		CH ₃		H		H			
						-		-				CH ₃		H		H		H			
258	Ir	2	1	P1	Bf2	H		H		Bf8	H	H		H		H		H			
						H		H				H		H		H		-			
						-		-				H		H		H		-			
						-		-				H		H		H		-			
259	Ir	2	1	P1	Bf3	H		H		Bf8	H	H		H		H		H			
						Ph ₂		H				H		H		OCH ₃		H			
						Ph ₂		-				H		H		H		-			
						-		-				H		H		H		-			
260	Ir	2	1	P1	Bf4	H		H		Bf8	H	H		H		-		-			
						Ph ₂		H				H		H		H		C ₆ H ₅			
						-		-				H		H		H		-			
						-		-				H		H		H		-			
261	Ir	2	1	P1	Ph1	H		H		Bf7	H	H		H		H		H			
						H		OCH ₃				-		-		-		-			
						-		-				H		H		H		-			
						-		-				H		H		H		-			
262	Rh	2	1	P1	Bf1	H		H		Bf8	H	H		H		-		-			
						-		-(CH=CH)2-				H		H		-		-			
						CH ₃		-				-		-		-		-			
						CH ₃		-				-		-		-		-			
263	Rh	2	1	P1	Bf1	H		H		Bf8	H	H		H		-		-			
						H		-(CH=CH)2-				H		-		-		-			
						CF ₃		-				-		-		-		-			
						CF ₃		-				-		-		-		-			
264	Rh	2	1	P1	Bf1	H		H		Bf8	H	H		H		-		-			
						H		H				-		-		-		-			
						Qn ₂		-				H		H		-		-			
						Qn ₂		-				H		H		-		-			
265	Rh	2	1	P1	Bf2	H		H		Bf8	H	H		H		-		-			
						H		H				H		H		-		-			
						Np ₃		-				H		H		-		-			
						Np ₃		-				H		H		-		-			
266	Pt	1	1	P1	Bf1	H		H		Bf8	H	H		H		-		-			
						H		H				-		-		-		-			
						CH ₃		-				-		-		-		-			
						CH ₃															

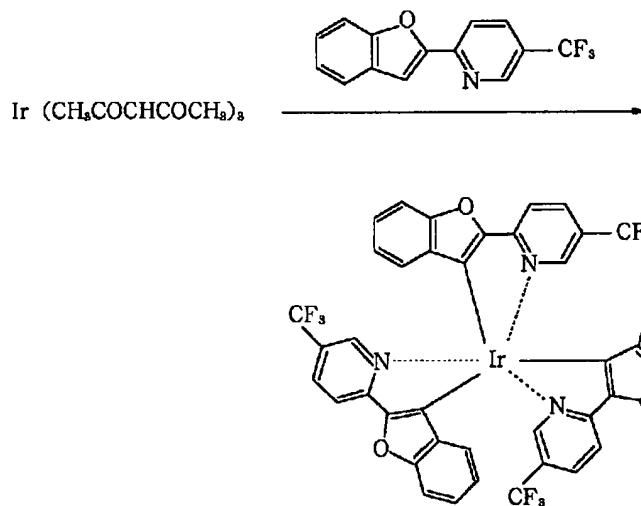


【0105】100mlの4つ口フラスコに2-クロロ-5-トリフルオロメチルピリジン2.80g(1.5.4mmol), 2-ベンゾフランボロン酸2.50g(1.5.4mmol), トルエン14ml, エタノール7mlおよび2M-炭酸ナトリウム水溶液14mlを入れ、窒素気流下室温で攪拌しながらテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)0.55g(0.48mmol)を加えた。その後、窒素気流下で4時間還流攪拌した。反応終了後、反応物を氷冷して

酢酸エチルと飽和食塩水を加えて室温で攪拌した。有機層を水洗し、硫酸マグネシウムで乾燥後溶媒を減圧乾固した。残渣をメタノール再結晶して白色結晶を得た。この結晶をトルエンを溶離液としたアルミナカラムクロマトで精製し、メタノール再結晶して2-(5-トリフルオロメチルピリジン-2-イル)ベンゾフラン0.72g(収率17.7%)を得た。

【0106】

【化18】



【0107】100mlの4つ口フラスコにグリセロール25mlを入れ、窒素バーリングしながら130~140°Cで2時間加熱攪拌した。グリセロールを100°Cまで放冷し、2-(5-トリフルオロメチルピリジン-2-イル)ベンゾフラン0.70g(2.66mmol), イリジウム(III)アセチルアセトネット0.23g(0.47mmol)を入れ、窒素気流下192~230°Cで7時間10分加熱攪拌した。反応物を室温まで冷却して1N-塩酸150mlに注入し、沈殿物を沪取・水洗し、アセトンに溶かして不溶物を沪去した。アセトンを減圧乾固し、残渣をメタノールで洗浄し、トルエンを溶離液としたシリカゲルカラムクロマトで精製し、トリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-トリフルオロメチルピリジン-C³, N]イリジウム(III)の赤色粉末0.11g(収率23.4%)を得た。

【0108】この化合物を「マトリックス支援イオン化-飛行時間型質量分析計」(MALDI-TOF MS)により質量分析を行なったところ、本化合物の親ピーカーM⁺(分子量に相当)を示す979.1を観測できたので、本化合物であると同定した。

【0109】この化合物のトルエン溶液のPLスペクトルのλ_{max}(最大発光波長)は622nmであり、前記の方法で発光であることを確認した。また発光量子収率は0.12であった。

【0110】実施例2~10および比較例1

次に本発明の実施例2~10および比較例1に用いた素子作成工程の共通部分を説明する。

【0111】素子構成として、図1(b)に示す有機層が3層の素子を使用した。図1(b)に示したように、透明基板15上の透明電極14と金属電極11の間に複数の有機膜層を設けた有機EL素子を作成した。有機膜層はホール輸送層13と発光層12と電子輸送層16からなる構成とした。

【0112】ガラス基板上に厚さ100nmのITOをパターニングして、対向する電極面積が3mm²になるようにした。そのITO基板上に、以下の有機層と電極層を10⁻⁴Paの真空チャンバー内で抵抗加熱による真空蒸着し、連続製膜した。

【0113】有機層1(ホール輸送層13)(厚さ40nm): α-NPD
有機層2(発光層12)(厚さ30nm): CBPおよ

び金属配位化合物（金属配位化合物重量比5重量%）
有機層3（電子輸送層16）（厚さ30nm）：Alq
3
金属電極層1（厚さ15nm）：AlLi合金（Li含有量1.8重量%）

金属電極層2（厚さ100nm）：Al

なお、有機層2（発光層12）のCBPおよび金属配位化合物の真空蒸着は、 10^{-4} Paの真空チャンバー内で抵抗加熱により、行なった。

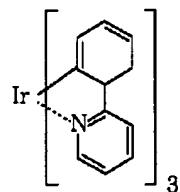
【0114】ITO側を陽極にAl側を陰極にして電界を印加し、電流値をそれぞれの素子で同じになるように電圧を印加して、輝度の時間変化を測定した。一定の電流量は70mA/cm²とした。その時に得られたそれぞれの素子の輝度の範囲は80~250cd/m²であった。

【0115】素子劣化の原因として酸素や水が問題なので、その要因を除くため真空チャンバーから取り出した後、乾燥窒素フロー中で上記測定を行った。比較例1で

は、従来の発光材料として、発光層に下記のIr(ppy)3を用いた。

【0116】

【化19】



Ir(ppy)3

【0117】各金属配位化合物を用いた素子の通電耐久テストの結果を表14に示す。従来の発光材料を用いた素子より明らかに輝度半減時間が大きくなり、本発明の材料の安定性に由来した耐久性の高い素子が可能になった。

【0118】

【表14】

表14

実施例No.	発光材料No.	輝度半減時間(時間)
2	(4)	800
3	(10)	900
4	(31)	750
5	(34)	900
6	(92)	800
7	(115)	650
8	(135)	750
9	(156)	850
10	(239)	600
比較例1	Ir(ppy)3	350

【0119】実施例11

図2に示した、TFT回路を用いて、カラー有機ELディスプレイを作成した。各色画素に対応する領域にハーフマスクを用いて、有機層および金属層を真空蒸着してパターニングを行った。各画素に対応する有機層の構成は以下の通りである。

【0120】緑画素： α -NPD(50nm)/Alq3(50nm)

青画素： α -NPD(50nm)/BCP(20nm)/Alq3(50nm)赤画素： α -NPD(40nm)/CBP：りん光発光材料(30nm)/BCP(20nm)/Alq3(40nm)

なお、カッコ()内の数値は厚さを示す。

【0121】りん光発光材料としては、例示化合物N_{o.}34を7%の重量比で用いた。画素数は、128×

128画素とした。所望の画像情報が表示可能なことが確認され、良好な画質が安定して表示されることが分かった。

【0122】実施例12

実施例1の2-クロロ-5-トリフルオロメチルピリジンの代わりに東京化成工業製の2-ブロモピリジンを用いる以外は実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)ピリジン-C³,N]イリジウム(III)（例示化合物N_{o.}31）

【0123】実施例13

実施例1の2-クロロ-5-トリフルオロメチルピリジンの代わりにFluorochrom USA社製の2-クロロ-4-トリフルオロメチルピリジンを用いる以外

は実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)-4-トリフルオロメチルピリジン-C³, N]イリジウム(II) (例示化合物No. 32)

【0124】実施例14

実施例1の2-クロロ-5-トリフルオロメチルピリジンの代わりにOakwood Products. Inc. 製の2-クロロ-4, 5-ビス(トリフルオロメチル)ピリジンを用いる以外は実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)-4, 5-ビス(トリフルオロメチル)-C³, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 33)

【0125】実施例15

実施例1の2-クロロ-5-トリフルオロメチルピリジンの代わりにGeneral Intermediates of Canada社製の4-フェニル-2-ブロモピリジンを用いる以外は実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)-4-フェニルピリジン-C³, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 35)

【0126】実施例16

実施例1と同様にして東京化成工業社製の2, 5-ジブロモピリジンとアルドリッチ社製の2-ベンゾフランボロン酸から2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-ブロモピリジンを合成し、東京化成工業社製の1-ナフチルボロン酸と反応させて2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-(ナフタレン-1-イル)ピリジンを合成し、実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-(ナフタレン-1-イル)ピリジン-C³, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 36)

実施例17

実施例16の1-ナフチルボロン酸の代わりに東京化成工業社製の2-ナフチルボロン酸を用いる以外は実施例16と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-(ナフタレン-2-イル)ピリジン-C³, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 42)

【0127】実施例18

東京化成工業社製の2, 5-ジブロモピリジンにアルドリッチ社製の2-ベンゾフランボロン酸を2当量反応させて2, 5-ビス(ベンゾフラン-2-イル)ピリジン

を合成し、実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2, 5-ビス(ベンゾフラン-2-イル)ピリジン-C³, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 47)

【0128】実施例19

実施例1と同様にして東京化成工業社製の2, 5-ジブロモピリジンとアルドリッチ社製の2-ベンゾフランボロン酸から2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-ブロモピリジンを合成し、アルドリッチ社製の3-チオフェンボロン酸と反応させて2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-(チオフェン-3-イル)ピリジンを合成し、実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-(チオフェン-3-イル)ピリジン-C³, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 50)

【0129】実施例20

図1(c)に示す有機EL素子を作成した。厚さ1.1mmの無アルカリガラス基板上にパターニング形成されたITO電極上に、蒸着圧力は10⁻⁴Paの真空中でホール輸送材料として α -NPDを蒸着レート0.1nm/secで40nmの厚みに真空蒸着し、次に発光層としてCBP中に実施例1で合成したトリス[2-(ベンゾフラン-2-イル)-5-トリフルオロメチルピリジン-C³, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 34)を3%の濃度になるように共蒸着して40nmの厚みで形成した。このときCBPの蒸着レートは0.1nm/secとし、イリジウム錯体は0.08nm/secになるように蒸着ポートの加熱条件を制御した。

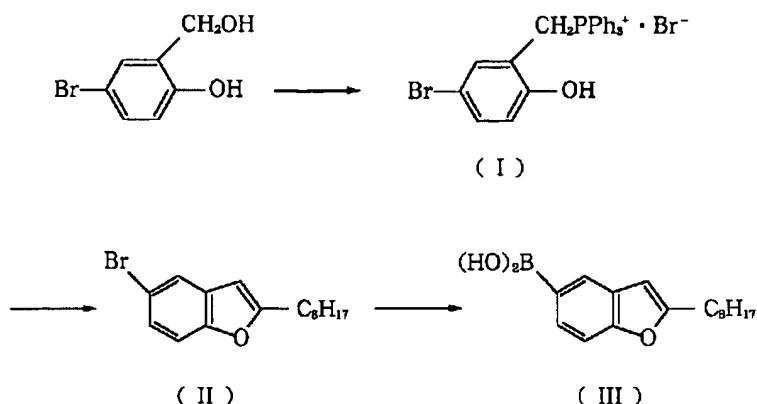
【0130】続いて励起子拡散防止層としてバソカプロインBCPを蒸着レート0.1nm/secで10nmの厚みで形成した。その上に電子輸送層としてAlq3を蒸着レート0.1nm/secで20nmの厚みで形成した後、陰極金属としてアルミニウムを蒸着レート1nm/secで150nm蒸着した。この素子のELスペクトルの λ_{max} (最大発光波長)は625nmであり、輝度100cd/m²で1.51m/Wの効率を示した。

【0131】実施例21

次に示す経路で2-オクチルベンゾフラン-5-ボロン酸(III)を合成した。

【0132】

【化20】



【0133】アルドリッチ社製の5-ブロモ-2-ヒドロキシベンジルアルコール145.8g(718mmol 1e)、トリフェニルホスフィン・HBr 246.5g(718mmol 1e)、アセトニトリル730mlを2L三口フラスコに入れ、3時間還流攪拌した。反応液を室温まで冷却し、析出した5-ブロモ-2-ヒドロキシベンジルトリフェニルホスホニウムブロミド(I)の結晶を沪取した。収量362.0g(収率95.5%)

【0134】1Lの三口フラスコに5-ブロモ-2-ヒドロキシベンジルトリフェニルホスホニウムブロミド(I)50.0g(94.7mmol 1e)、1-ノナン酸無水物31.1g(104mmol 1e)、トルエン450ml、トリエチルアミン39.6g(392mmol 1e)を入れ、6時間還流攪拌した。反応液を室温まで冷却し、析出した結晶を沪去し、沪液を減圧乾固して残渣をヘキサンを溶離液としたシリカゲルカラムクロマトで精製し、2-オクチル-5-ブロモベンゾフラン(I)の無色油状物25.1g(収率85.8%)を得た。

【0135】500mlの三口フラスコに2-オクチル-5-ブロモベンゾフラン(I)19.0g(61.5mmol 1e)、無水テトラヒドロフラン190mlを入れ、アルゴン気流下、-70℃以下でn-ブチルリチウムのヘキサン溶液を30分間で滴下した。その後、同じ温度で4時間攪拌した。次にトリメチルボレート17.8g(171mmol 1e)を無水テトラヒドロフラン70mlに溶かし、-70℃以下で20分間かけて滴下した。その後、同じ温度で2時間攪拌し、徐々に室温まで上げて17時間攪拌した。反応液に氷冷下10%塩酸100mlを滴下し、エーテルで抽出し、有機層を水洗、芒硝乾燥後減圧乾固した。残渣をヘキサン/酢酸エ

チル: 4/1を溶離液としたシリカゲルカラムクロマトで精製し、2-オクチルベンゾフラン-5-ボロン酸(III)の白色結晶25.1g(収率64.3%)を得た。

【0136】実施例1の2-ベンゾフランボロン酸の代わりに2-オクチルベンゾフラン-5-ボロン酸(II)を用い、2-クロロ-5-トリフルオロメチルピリジンの代わりに2-ブロモピリジンを用いる以外は実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(2-オクチルベンゾフラン-5-イル)ピリジン-C³, N]イリジウム(III)(例示化合物No. 62)

【0137】実施例2 2

実施例2 1のノナン酸無水物の代わりに安息香酸塩化物を用いて2-フェニル-5-ブロモベンゾフランを合成し、同様にして2-フェニルベンゾフラン-5-ボロン酸を合成し、次いで2-フェニル-5-(5-トリフルオロメチルピリジン-2-イル)ベンゾフランを合成し、実施例1と同様にして次の化合物を合成した。

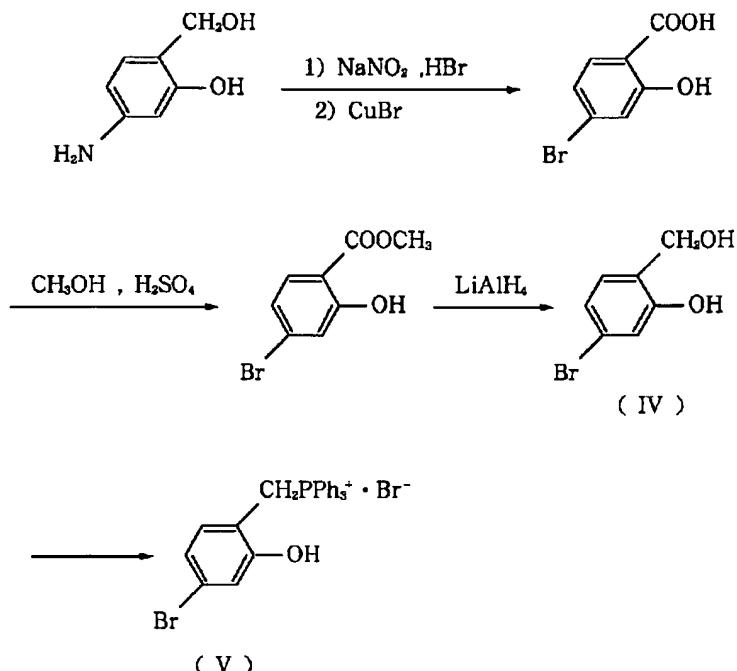
トリス[2-(2-フェニルベンゾフラン-5-イル)-5-トリフルオロメチルピリジン-C³, N]イリジウム(III)(例示化合物No. 61)

【0138】実施例2 3

次に示す経路でアルドリッチ社製の4-アミノサリチル酸から4-ブロモ-2-ヒドロキシベンジルアルコール(IV)を合成し、実施例2 1と同様にして4-ブロモ-2-ヒドロキシベンジルトリフェニルホスホニウムブロミド(V)を合成した。

【0139】

【化21】



【0140】実施例21の1-ノナン酸無水物の代わりに1-ブタン酸無水物を用いる以外は全く同様にして次の化合物を合成した。

トリス[2-(2-プロピルベンゾフラン-6-イル)ピリジン-C⁵, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 72)

【0141】

【発明の効果】以上説明した様に、本発明の金属配位化合物を発光材料として用いた発光素子は、高効率発光で、長時間高輝度を保ち、かつ安定性が高く耐久性に優れた効果がある。また、本発明の発光素子を用いると、良好な画質が安定して表示される表示装置を提供できる効果がある。

【図面の簡単な説明】

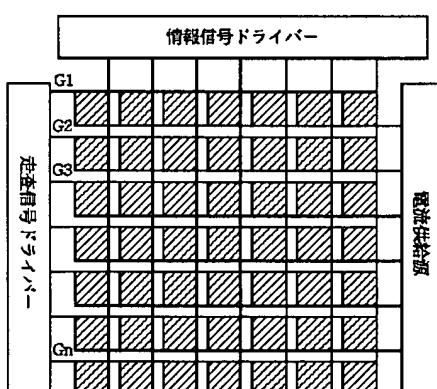
【図1】本発明の発光素子の一例を示す図である。

【図2】本発明の発光素子と駆動手段を備えたパネルの構成の一例を模式的に示した図である。

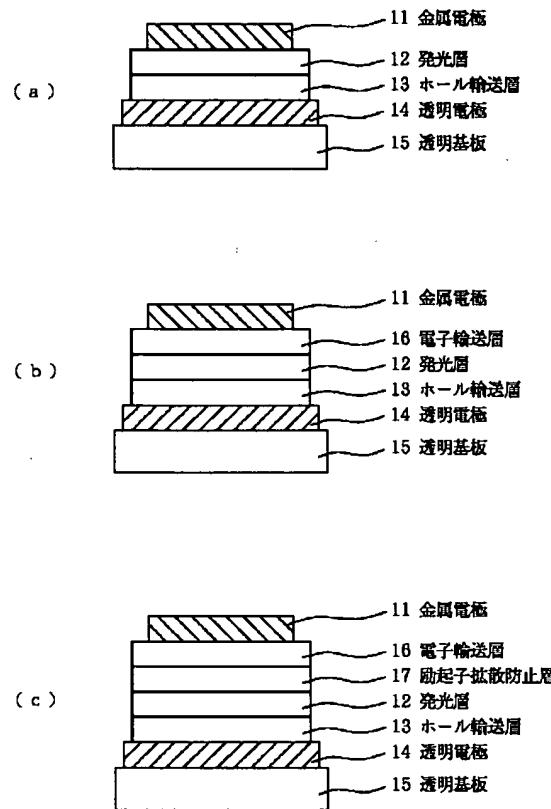
【符号の説明】

- 1 1 金属電極
- 1 2 発光層
- 1 3 ホール輸送層
- 1 4 透明電極
- 1 5 透明基板
- 1 6 電子輸送層
- 1 7 励起子拡散防止層

【図2】



【図1】



フロントページの続き

(72)発明者 鎌谷 淳

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ
ノン株式会社内

(72)発明者 岡田 伸二郎

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ
ノン株式会社内

(72)発明者 三浦 聖志

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ
ノン株式会社内

(72)発明者 森山 孝志

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ
ノン株式会社内

(72)発明者 古郡 学

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ
ノン株式会社内

F ターム(参考) 3K007 AB02 AB03 AB11 DB03

4H050 AA01 AA03 AB91 WB11 WB21